

Title	11. Spinless Fermion結晶における集団運動(基研長期研究計画「量子固体」,研究会報告)
Author(s)	寺中, 久男
Citation	物性研究 (1977), 28(6): F49-F54
Issue Date	1977-09-20
URL	<a href="http://hdl.handle.net/2433/89397">http://hdl.handle.net/2433/89397</a>
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

ことに対応する。

不純物 ( $\delta$ -関数型外場) がたくさんある場合にも、不純物間の相関を無視すれば計算できるが、結果は単に (4) で  $U_0^2 \rightarrow U_0^2 (c/2N)$  と置きかえればよい。ここで  $c$  は impurity concentration,  $N$  は流体の全粒子数。

#### 参 考 文 献

- 1) A. J. Leggett, Phys. Rev. Lett. **25** (1970), 1543. G. V. Chester, The Helium Liquids, edited by I. G. M. Armitage and I. E. Farqhar (Academic Press, London, 1975) P. 1.
- 2) W. Kohn, Phys. Rev. **133** (1964), A171.
- 3) T. Izuyama, Prog. Theor. Phys. **56** (1976), 1674, **57** (1977), 42.  
物性若手夏の学校講義ノート (1977)
- 4) A. Miller, D. Pines and P. Nozières, Phys. Rev. **127** (1962), 1452.

### Spinless Fermion 結晶における集団運動

名大理 寺 中 久 男

§ 1. 粒子の零点振動が大きく、絶対零度でも結晶全体に広がった状態の格子欠陥 (zero point defecton) を持ち、粒子数と格子点の数が異なる量子結晶の振舞いはAndreev-Lifshitz<sup>1)</sup>によって最初に論ぜられた。この様な結晶は、多粒子間の相互作用により、一体の周期ポテンシャルと一粒子状態 (energy band) が作られ、結晶状態と部分的に空の状態のあるバンド状態 (Boson の場合は最低 level に、Fermion の場合は Fermi level まで粒子が詰っている状態) が共存している様な系である。ある意味で金属に似ているが、金属中の電子と比べると、電子はイオンの作る周期的な外場の中を運動しているのに対して、上の状態は、粒子が自分自身で作った周期場中を運動しているという違いがある。

以下では、Fermi 粒子系を考える。格子を作っている原子の (核) スピンが、強磁

性的に配列している場合には、vacancy が隣りの site にとび移って行っても、系のスピン配列を乱すことはなく、vacancy wave (defecton) の描像は成り立つ。しかし、vacancy が最近接格子点へのとび移りを通して移動する時、系のスピンの常磁性或いは反強磁性状態であれば、スピン状態が乱されるので、vacancy の運動とスピンのゆらぎの相互作用を考慮しなければならなくなる。最近接格子点へのとび移りを考え、スピンの零点振動を無視した範囲で、Brinkman-Rice<sup>2)</sup> は、Ferro のときの band width に対して、Para, AF 状態での bulk band width は、それぞれ、約 20 %, 25 % 縮み、band tail が出来るという結果を出している。この結果によれば vacancy は、quantum tunneling というよりは、むしろ diffusive な運動をすることになる。

vacancy の数が増大すれば、原子の反強磁性交換相互作用にうち勝って系のスピン配列を Ferro<sup>3)</sup> にする可能性がある。この場合の濃度は大体  $10^{-4}$  以上となって、かなりの vacancy が必要である。vacancy の数がこれより少ない場合、その縮退温度  $T_F$  は Neel 温度  $T_N \sim 10^{-3}$  K より低いので、縮退した defecton(vacancy) を考えるには、スピンの秩序状態を考えなければならない。

Dzyaloshinskii et al.<sup>4)</sup> は、Fermion quantum crystal に於ける集団運動について調べ、phonon と zero sound の coupled equation を導いた。しかし、この理論は、スピンについての考慮が不十分であり、spinless Fermion を対象にした様になっている。

Spin fluctuation の 1 粒子運動への影響を考えることは重要であるが、まず、これを避けて、vacancy-phonon 相互作用を調べるために、強磁場をかけてスピンを強磁性的に揃えた場合を考える。この場合には、spinless Fermion を対象とすることができる。そこでまず、spinless Fermion Crystal に於ける集団運動について調べる。

§ 2. ここでは、強い斥力部分と、弱い引力部分を持つ Soft core potential を仮定し、次の Hartree-Fock 方程式で決定される一粒子状態を出発点にとる。

$$\left[ -\frac{1}{2m} \nabla^2 + \sum_{\mathbf{k}'n'} n_{\mathbf{k}'n'} \int \varphi_{\mathbf{k}'n'}^*(\mathbf{r}) \varphi_{\mathbf{k}'n'}(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}-\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right] \varphi_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}) \\ - \sum_{\mathbf{k}'n'} n_{\mathbf{k}'n'} \int \varphi_{\mathbf{k}'n'}^*(\mathbf{r}') \varphi_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}-\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \varphi_{\mathbf{k}'n'}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{k}n} \varphi_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r}),$$

ここで、 $\varphi_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})$  は Bloch 関数、 $n_{\mathbf{k}n}$  は分布関数、 $\mathbf{k}$  は first Brillouin zone の波数、 $n$

は band index ,  $\epsilon_{\mathbf{k}n}$  は band energy である。  $V(\mathbf{r}) = V(|\mathbf{r}|)$  ,  $\hbar = 1$  として、絶対零度を考える。系の Hamiltonian は、

$$\mathcal{H} = \int \psi^\dagger(\mathbf{r}) \frac{-1}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} d\mathbf{r}'$$

場の演算子  $\psi$  を Bloch 関数で展開する。  $C_{\mathbf{k}n}^\dagger$  ,  $C_{\mathbf{k}n}$  を Bloch 状態の生成、消滅演算子として、この Hamiltonian による次の運動方程式を作る。

$$\omega \langle g | C_{\mathbf{k}n}^\dagger C_{\mathbf{k}+\kappa n'} | e \rangle = \langle g | [C_{\mathbf{k}n}^\dagger C_{\mathbf{k}+\kappa n'}, \mathcal{H}] | e \rangle$$

$$\mathcal{H} | i \rangle = E_i | i \rangle, \quad i = g, e. \quad \omega = E_e - E_g,$$

$g$  は  $\mathcal{H}$  の基底,  $e$  は低い励起状態を表わす。これは、  $n = n' = \text{lowest band}$  の場合 zero sound,  $n \neq n'$  の場合 phonon を表わす。RPA で計算し、tight binding 近似をすると、

$$f_{nn'}(\mathbf{k}, \kappa) = \frac{n_{\mathbf{k}n} - n_{\mathbf{k}+\kappa n'}}{\omega + \epsilon_{\mathbf{k}n} - \epsilon_{\mathbf{k}+\kappa n'}} \sum_{\mathbf{k}', mm'} [K_{n'n, mm'}(\kappa) - K_{n'm', mn}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')] f_{mm'}(\mathbf{k}' \kappa)$$

ここで、  $f_{nn'}(\mathbf{k}, \kappa) = \langle g | C_{\mathbf{k}n}^\dagger C_{\mathbf{k}+\kappa n'} | e \rangle$  ,

$$\begin{aligned} K_{n'n, mm'}(\kappa) &= \frac{1}{N} \sum_{\delta} e^{i\kappa \cdot \mathbf{R}_\delta} V_{n'n, mm'}(\mathbf{R}_\delta) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\delta} e^{i\kappa \cdot \mathbf{R}_\delta} \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' W_{n'}(\mathbf{x}) W_n(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}-\mathbf{x}'-\mathbf{R}_\delta) W_m(\mathbf{x}') W_{m'}(\mathbf{x}') \end{aligned}$$

$W_n$  は wannier 関数,  $\mathbf{R}_\delta$  は 0 及び最近接点を結ぶ vector。この式は次の self-consistency condition により、  $\kappa = 0$  とした時、  $\omega = 0$  の解を持つことを示している。即ち、

$$\langle \mathbf{k}n | [\mathcal{H}^{\text{HF}}, \mathbf{P}] | \mathbf{k}n' \rangle = (\epsilon_{\mathbf{k}n} - \epsilon_{\mathbf{k}n'}) \langle \mathbf{k}n | \mathbf{P} | \mathbf{k}n' \rangle$$

但し、  $\mathbf{P}$  は全運動量である。左辺を計算すると、

$$\begin{aligned} (\epsilon_{\mathbf{k}n} - \epsilon_{\mathbf{k}n'}) \Pi_{nn'}(\mathbf{k}) &= (n_{\mathbf{k}n} - n_{\mathbf{k}n'}) \sum_{\mathbf{k}', mm'} [K_{nn', m'm}(0) \\ &\quad - K_{nm, m'n'}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')] \Pi_{mm'}(\mathbf{k}'), \end{aligned}$$

ここで,  $\Pi_{nn'}(\mathbf{k}) = (n_{\mathbf{k}n} - n_{\mathbf{k}n'}) \langle \mathbf{k}n | \mathbf{P} | \mathbf{k}n' \rangle$ 。

§ 3. one band の場合：縦ゼロ音波について考えてみる。band indices は省略する。

$$\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}, \kappa) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k}} - n_{\mathbf{k}+\kappa}}{\omega + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\kappa}} \sum_{\mathbf{k}'} [K(\kappa) - K(\mathbf{k}-\mathbf{k}')] f(\mathbf{k}', \kappa)$$

vacancy の数が少ない場合を考えているので band はほとんど詰っていて、わずかに hole の部分がある。hole の Fermi 波数を  $k_0$  として  $R\kappa \ll Rk_0 \ll 1$  ( $R$ : lattice constant) の場合を考える。 $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$  は Fermi 面近傍の波数であるので、これらを hole 側から測り直すと大きさは  $k_0$  近くの値である。従って、上の条件によって  $K$  は  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\delta$  等で展開することができる。上式の角括弧内の  $K$  の強い斥力部分は相殺する。それぞれの  $K$  を展開して、 $k_0$  に対して  $\kappa$  を省略すると次の様になる。

$$\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}, \kappa) = V_0 \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k}-\kappa} - n_{\mathbf{k}}}{\omega + \epsilon_{\mathbf{k}-\kappa} - \epsilon_{\mathbf{k}}} \sum_{\mathbf{k}'} [\mathbf{k}^2 + \mathbf{k}'^2 - 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'] f(\mathbf{k}', \kappa)$$

ここで,  $V_0 = \frac{1}{6N} \sum_{\delta} R_\delta^2 V_{00,00}(\mathbf{R}_\delta)$ 。

$\mathbf{k}'$  で和をとるとき、括弧の第2項は  $k_0^2$  の因子を与えるだけであるが、第3項を扱うために、

$$f(\kappa) \equiv \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}, \kappa), \quad f_1 \equiv \sum_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} f(\mathbf{k}, \kappa)$$

を定義し  $f_1$  ( $\kappa$  に比例) を  $f$  で表わす。音速を決める式は次の様になる。

$$\begin{aligned} \frac{1}{3} - (S^2 - 1) \left( -1 + \frac{1}{2} S \ell_n \left| \frac{S+1}{S-1} \right| \right) \\ = \frac{1}{F_0} + \frac{1}{3} F_0 \left( -1 + \frac{1}{2} S \ell_n \left| \frac{S+1}{S-1} \right| \right), \end{aligned}$$

ここで、

$$F_0 \equiv (V_0 k_0^2) \frac{m^* k_0}{\pi^2}, \quad S \equiv \frac{\omega}{v_F \kappa},$$

ただし,  $m^*$  は band mass,  $v_F$  は Fermi velocity である。この式は,  $F_0$  の符号によらず, 実数解を持たない。従って, 良いモードとしてのゼロ音波は存在しない。このことは, spinless Fermion にすることによって, exchange 項が強く効いて, ポテンシャルの斥力部分を相殺するためである。

横ゼロ音波も存在しない。

§ 4. Two-band の場合: 簡単のために upper band の縮退を無視する。lower band 内の運動との coupling をまず省略して, band 間の遷移による集団運動を調べる。局在原子モデルでレベル間遷移によるフォノンの研究は, 多くの人達<sup>5)</sup>によって研究されているが, ここでは band picture で vacancy が存在する場合を調べる。原子間の斥力を大きくした場合にも残る項のみを考えると,

$$\begin{pmatrix} 1 - [K_1(\kappa) - U]G_{01}(\omega\kappa), & -K_1(\kappa)G_{01}(\omega\kappa) \\ K_1(\kappa)G_{10}(\omega\kappa), & 1 + [K_1(\kappa) - U]G_{10}(\omega\kappa) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_{01}(\kappa) \\ F_{10}(\kappa) \end{pmatrix} = 0,$$

ここで,  $F_{nm}(\kappa) = \sum_{\mathbf{k}} f_{nm}(\mathbf{k}, \kappa)$ ,

$$G_{nm}(\omega\kappa) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_{\mathbf{k}\kappa} + n_{\mathbf{k}+\kappa\kappa}}{\omega + \epsilon_{\mathbf{k}\kappa} - \epsilon_{\mathbf{k}+\kappa\kappa}}, \quad n_{\mathbf{k},1} = 0,$$

$$U = \frac{1}{N} (V_{00,11}(0) - V_{10,10}(0)), \quad K_1(\kappa) = \frac{1}{N} \sum_{\delta \neq 0} e^{i\kappa \cdot \mathbf{R}_\delta} V_{10,10}(\mathbf{R}_\delta)$$

平均バンド間隔  $\Delta$  に比べてバンド幅が十分狭い時には, ( $N$  は格子点,  $n_0$  は vacancy の数)

$$\omega^2 \cong -4K_1(0) [K_1(\kappa) - K_1(0)] \left[ 1 - \frac{3}{2} \frac{\Delta}{K_1(0)} \frac{n_0}{N} \right]$$

ここで, self-consistency condition を使った。  $K_1(0) < 0$ 。音速は, vacancy の無い ( $n_0 = 0$ ) 場合より大きくなる。

§ 5. つぎにバンド内の運動との coupling を考える。金属の場合, イオンの質量が大きいので, 音速は電子の Fermi velocity に比べて小さく, 電子は, すばやくイオンの

寺中久男

運動に随伴する。一方 vacancy を含む Fermi crystal では vacancy の Fermi velocity は小さく、音速は比較的大きいので単純に金属中の電子に対応させることはできない。この場合、波数  $\kappa$  に対して 2 つの領域を考える事ができる。 $n_0 k_0 / N < \kappa$ 、この時は、波数  $\kappa$  でバンド内の運動とフォノンが couple して、フォノン振動数を shift させる。集団運動は、このフォノン・モードだけである。 $n_0 k_0 / N > \kappa$  の場合には、exchange が相対的に大きく寄与して、長波長フォノンに影響を与える。

### 参 考 文 献

- 1) A. F. Andreev and I. M. Lifshitz, Sov. Phys. JETP 29, 1107 (1969)
- 2) W. F. Brinkman and T. M. Rice, Phys. Rev. B2, 1324 (1970)
- 3) Y. Nagaoka, Phys. Rev. 147, 392 (1966)
- 4) I. E. Dzyaloshinskiĭ, et al., Sov. Phys. JETP 35, 823 and 1213 (1972)
- 5) W. Brenig, Z. Physik 171, 60 (1963) D. R. Fredkin and N. R. Werthamer, Phys. Rev. 138, A1527 (1965) H. Nomaizawa, J. Low Temp. Phys. 22, 335 (1976)

## ヘ リ ウ ム 吸 着 膜

東大教養 生 井 沢 寛

通称グラフォイル、と呼ばれる非常に滑らかで、吸着面積の大きい吸着体が登場してから、種々の物質の吸着膜の物理的性質が精力的に研究され、これらの準 2 次元的な世界も予想外に変化に富んでいる事が判って来ている<sup>1)</sup>。筆者の当面の興味の的は、2 次元量子固体であるが、ここでは、吸着されたヘリウム膜（主に単膜）について実験的に知られた主要な物理的事実をまとめて報告し、その後で筆者のやっている事を簡単に紹介したい。

ヘリウム吸着膜の相図<sup>2)</sup>は、比熱測定<sup>2,3)</sup>、共存する気体の蒸気圧測定<sup>3)</sup>によって詳しく調べられている。その模式図を図 1 に描いた。

密度の低い場合には、自由気体と違い、吸着台の影響が大きく、吸着面の最も吸着力の強い部分から順次束縛されて、面の不均一性や不純物に強く左右された相が出来ると